

Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука

УДК 530.145

МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

на тему:

”Дослідження енергетичних рівнів спінових систем на квантовому комп’ютері”

Виконав студент групи ФзФм-21с
спеціальності 104 “Фізика та астрономія”
Тонне М. П.

Керівник доц. Гнатенко Х. П.

Рецензент доц. Бовгира О. В.

м. Львів – 2022 р.

Анотація

Виконується кількісна оцінка енергетичних рівнів спінових систем методом дослідження еволюція середнього значення пробного спіна в моделі трикутного спінового кластера та моделі Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію. Отримано аналітичні вирази для визначення енергетичних рівнів досліджуваних систем. Запропоновано квантові протоколи для реалізації дослідження двох часткових випадків спінових систем зі взаємодією Ізінга методом вивчення еволюції середнього значення пробного спіна на квантових комп'ютерах та симуляторах ІВМ. Результати обчислень на квантовому симуляторі добре узгоджуються з отриманими теоретичними результатами.

Ключові слова: енергетичні рівні, спінові системи, квантовий комп'ютер.

Abstract

Estimation of energy levels of spin systems is performed by the method of studying the evolution of the mean value of the probe spin in the triangle spin cluster and the Ising model on squared lattice with the magnetic field twice smaller than the interaction. Analytical expressions for determining the energy levels of the studied systems are obtained. Quantum protocols are proposed for the study of two partial cases of spin systems with Ising interaction by probe spin evolution method on IBM's quantum computer and simulators. The results of quantum calculations are in good agreement with the obtained theoretical results.

Key words: energy levels, spin systems, quantum computer.

Зміст

Вступ	4
Розділ 1	
Огляд літератури	7
1.1 Квантовий комп'ютер та квантові обчислення	7
1.2 Алгоритм оцінки фази	8
Розділ 2	
Еволюція середнього значення пробного спіна та енергетичні рівні спінових систем	12
2.1 Трикутний спіновий кластер з магнітним полем відмінним від взаємодії	14
2.2 Модель Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем відмінним від взаємодії	15
Розділ 3	
Оцінка енергетичних рівнів спінових систем на квантовому комп'ютері IBM	17
3.1 Вивчення еволюції пробного спіна в моделі трикутного спінового кластера	17
3.2 Вивчення еволюції пробного спіна в моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітному полі	18
3.3 Результати квантових вимірювань	18
Висновки	21
Список використаних джерел	22

Вступ

Актуальність теми. Дослідження енергетичних рівнів фізичних систем – одна з центральних задач квантової механіки, яку можна розв'язати на квантовому комп'ютері. Сучасний стан розвитку квантових комп'ютерів дозволяє розглядати їх у майбутньому як потужний інструмент для вирішення проблеми визначення енергетичного спектру гамільтоніана. Тому, вже зараз існують спеціально розроблені алгоритми [2, 3, 4, 5]. Серед них, запропонований Кітаєвим, Ллойдом та Абрамсом, квантовий алгоритм оцінки власного значення (також відомий як алгоритм оцінки квантової фази). Він дозволяє оцінити фазу (власне значення) власного вектора унітарного оператора. Цей алгоритм є достатньо поширеним (див. [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10] та посилання в них). Цей алгоритм заснований на знаходженні власного значення λ або фази φ унітарного оператора. Це можливо оскільки фаза φ унітарного оператора еволюції квантової системи пов'язана з власними значеннями гамільтоніана. Тому, враховуючи унітарну матрицю U та квантовий стан $|\psi\rangle$ такі, що $U|\psi\rangle = e^{2\pi i\varphi}|\psi\rangle$, алгоритм оцінює значення фази φ з високою точністю в межах адитивної похибки ε .

Також існують гібридні квантово-класичні алгоритми, за допомогою яких можна дослідити енергетичні рівні. Серед них алгоритм квантової наближеної оптимізації та варіаційний власний квантовий вирішувач [11, 12, 13, 14] .

В роботах [15, 16] представлено ефективний метод оцінки власних значень гамільтоніана досліджуючи часову залежність математичного очікування оператора еволюції. Також відомий квантовий алгоритм Ланкоша [17] (квантовий аналог мінімально заплутаних типових теплових станів), за допомогою якого можливо визначити основні, збуджені та теплові стани на квантовому комп'ютері. Кубіт-ефективна схема дослідження властивостей основних станів систем багатьох тіл запропонована в [18].

У роботі [19] був запропонований алгоритм виявлення енергетичних рівнів квантової системи на квантовому комп'ютері, який заснований на дослідженні еволюції середнього значення оператора, який антикомутує з гамільтоніаном досліджуваної системи. Існування антикомутуючого оператора свідчить про симетрію енергетичного спектра, тому метод був реалізований для систем з симетричними спектрами.

Об'єктом досліджень є трикутний спіновий кластера, спінові системи, які описуються моделлю Ізінга на квадратній ґратці у магнітному полі.

Предметом досліджень є енергетичні рівні трикутного спінового кластера, спінових систем, які описуються моделлю Ізінга на квадратній ґратці у магнітному полі.

Мета роботи і завдання. Метою магістерської роботи є здійснення кількісної оцінки енергетичних рівнів спінових систем шляхом дослідження еволюції пробного спіна на квантових комп'ютерах ІВМ.

Для досягнення мети дослідження було поставлено такі завдання: отримати аналітичні вирази для середнього значення пробного спіна уведеного до досліджуваних спінових систем; скласти схеми квантових протоколів для реалізації на квантовому комп'ютері з урахуванням його архітектури; провести вимірювання на квантовому комп'ютері; побудувати відповідні експериментальні залежності та порівняти результати квантових та аналітичних обчислень.

Методи досліджень: квантовомеханічні методи, методи квантового програмування.

Структура роботи

У **Розділі 1** представлено огляд літератури. Зокрема подається обґрунтування необхідності та перспективності використання квантових комп'ютерів для виконання деяких типів обчислень та моделювань. Окрім цього, представлено опис загальної ідеї алгоритма квантової оцінки фази на квантовому комп'ютері.

У **Розділі 2** подано теоретичне обґрунтування методу квантової оцінки фази шляхом дослідження еволюції середнього значення пробного спіна для часткових випадків спінових систем.

Розділ 3 присвячений побудові квантових протоколів для дослідження еволюції середнього значення пробного спіна у двох часткових випадках: трикутного спінового кластера та моделі Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію на квантовому комп'ютері ІВМ та кількісній оцінці енергетичних рівнів вказаних спінових систем.

У **Розділі 3** представлено оригінальні результати досліджень. Магістерська робота завершується **Висновками** та **Списком використаних джерел**.

Наукова новизна отриманих результатів. У роботі вперше виконано оцінку енергетичних рівнів систем, які описуються моделями трикутного спінового кластера та Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодією на квантовому симуляторі ІВМ.

Практичне значення отриманих результатів. Кількісна оцінка енергетичних рівнів спінових систем одна з ключових задач квантової механіки. Результати, отримані в рамках виконання роботи, є важливими доповненням для подальшого дослідження енергетичних спектрів спінових систем.

Розділ 1

Огляд літератури

1.1 Квантовий комп'ютер та квантові обчислення

Поняття алгоритму є одним з найфундаментальніших наукових понять. В точних дисциплінах алгоритми використовувалися завжди, але формальне визначення цього поняття було дано тільки в 30-х роках 20 століття у працях Т'юринга, Поста і Маркова (молодшого).

Алгоритми завжди описувалися (і досі описуються) не зовсім формально, а саме, вони задаються у вигляді деякої інструкції, яка містить послідовність елементарних дій. Строге поняття алгоритма та обчислень знадобилось тільки тоді, коли у людства виникли сумніви стосовного того, чи взагалі існують розв'язки деяких задач. Відомі машина Т'юринга, нормальні алгоритми Маркова, машини Поста, алгоритми Колмогорова-Успенського та ін. є формалізаціями поняття алгоритма у яких поняття обчислюваної функції є однаковим. Це означає що обчислювана функція в одній формалізації є також обчислюваною і в інших формалізаціях, більше того, якщо така функція обчислювана за поліноміальний час в одній з формалізацій, то вона буде обчислюваною за поліноміальний час в будь якій іншій формалізації.

Застосувавши поняття алгоритму для оцінки перспектив класичного моделювання квантових еволюцій, оскільки все зводиться до обчислення експоненти від матриці, пропорційної до гамільтоніана системи, можна сверджувати що будь-яка квантова еволюція може бути розрахована на класичному комп'ютері з будь якою наперед заданою точністю. Отже неможливо побудувати за допомогою квантової механіки обчислювальну машину, яка "обчислювала" би необчислювані функції.

Однак класифікувати задачі за їх розв'язуваністю, особливо, якщо на їх розв'язування може знадобитися час більший за вік Всесвіту, або пам'ять, яка перевищує кількість елементарних частинок в ній. Доцільніше класифікувати задачі по складності їх розв'язання. В якості міри складності можна обрати пам'ять, час чи навіть їх суму. За наявності великої кількості ресурсу часу його часто можна конвертувати в економію пам'яті. Однак, нажаль, зворотне конвертування у більшості випадків не можливе. Таким

чином, в теорії алгоритмів саме час вважається найбільш цінним ресурсом.

Перейдемо до квантових комп'ютерів. Відомий в електроніці закон Мура каже, що кожного року розмір обчислювальних елементів зменшується вдвічі, а отже з тією ж швидкістю зростає тактова частота обчислень. Нажаль, це зовсім не означає, що обчислювальні потужності можуть безмежно зростати. Вся справа в тому, що у сучасних комп'ютерів існує фундаментальна фізична межа зменшення їх елементарних комірок пам'яті – розмір атомів. Для елементів, розмір яких порядку розмірів атома (близько 1 ангстрем), починають діяти квантові закони мікросвіту. Проте навіть якщо навчитися оперувати елементарними частинками, як вже згадувалося вище, ряд принципових проблем все одно залишиться "недоступним" для класичних комп'ютерів та алгоритмів.

Принципова ідея, яка дозволила би подолати такий поріг "доступності" була висунута у 80-х роках Фейнманом, який запропонував використовувати замість класичного квантовий комп'ютер для дослідження квантових систем. В той же час Беніофф запропонував використовувати гамільтоніан квантових систем для виконання обчислень. Однак, першим, хто математично строго сформулював поняття квантового обчислення, був Дойч. Основні квантові обчислювальні "трюки" були винайдені Шором (квантове перетворення Фур'є) та Гровером (квантовий перебір).

На основі комбінування цих та подібних ідей з вже відомими підходами теорії алгоритмів побудовано багато квантових алгоритмів, які за ефективністю якісно перевершують усі можливі класичні алгоритми. Ця перевага настільки суттєва, що дозволяє розв'язувати такі проблеми, які навіть не розглядаються в якості розв'язуваних на сучасних комп'ютерах.

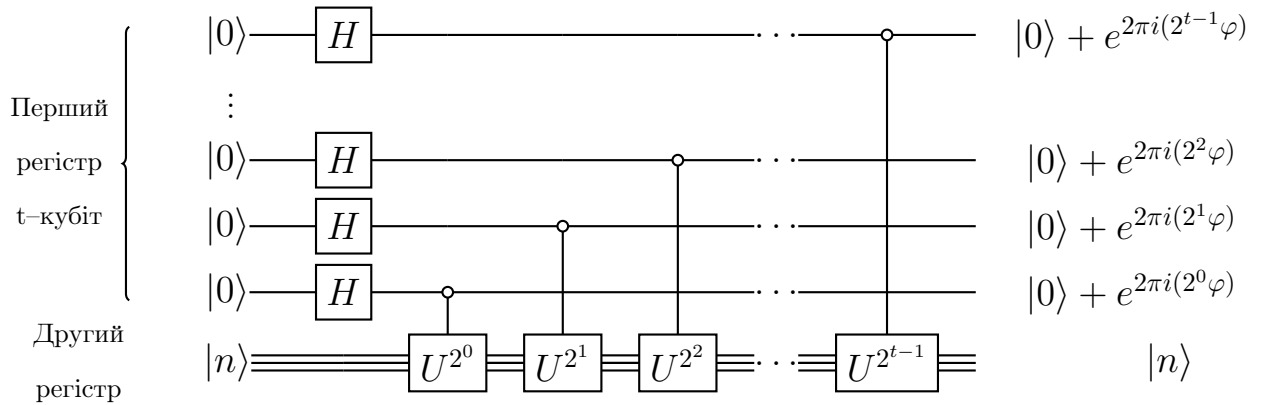
1.2 Алгоритм оцінки фази

Фур'є-перетворення є основою для загальної процедури, відомої як оцінка фази, яка є ключовою для багатьох квантових алгоритмів.

Нехай є унітарний оператор U , який має власний вектор $|U\rangle$ і відповідне власне значення $\exp(2\pi i\varphi)$, де φ – невідоме. Задача алгоритму оцінки фази полягає в обчисленні φ .

Квантова процедура оцінювання фази використовує два регістри. Перший регістр містить t кубітів, які знаходяться у стані $|0\rangle$. Другий регістр починається зі стану $|U\rangle$ і містить стільки кубітів, скільки необхідно

для створення $|U\rangle$. Перший крок процедури обчислення фази визначається таким квантовим колом

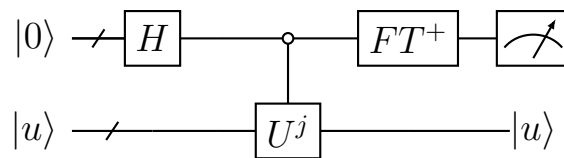


Це коло полягає у використанні гейта Адамара з наступним використанням *controlled* – U – операція на другий реєстр, з U збільшеним до степені 2. Кінцевий стан першого реєстра буде мати вигляд:

$$\frac{1}{2^{t/2}} (|0\rangle + \exp(2\pi i 2^{t-1} \varphi) |1\rangle) (|0\rangle + \exp(2\pi i 2^{t-2} \varphi) |1\rangle) \dots$$

$$\dots (|0\rangle + \exp(2\pi i 2^0 \varphi) |1\rangle) = \frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} \exp(2\pi i \varphi k) |k\rangle \quad (1.1)$$

Стан другого реєстра не змінюється. Наступний крок обчислення фази полягає в застосуванні квантового перетворення Фур'є для першого реєстра. Воно утворюється шляхом перетворення кола квантового Фур'є-перетворення. Останнім кроком є читання стану першого реєстра. Схематично весь алгоритм можна зобразити таким колом



Нехай φ – виражається точно t -бітам $\varphi = 0.\varphi_1 \dots \varphi_t$, тоді стан, після першого кроку оцінки може бути записаний у вигляді:

$$\frac{1}{2^{t/2}} (|0\rangle + \exp(2\pi i 0.\varphi_t) |1\rangle) (|0\rangle + \exp(2\pi i 0.\varphi_{t-1}\varphi_t) |1\rangle) \dots$$

$$\dots (|0\rangle + \exp(2\pi i 0.\varphi_1\varphi_2 \dots \varphi_t) |1\rangle) \quad (1.2)$$

Використовуючи вираз для Фур'є-перетворення у вигляді добутку,

Позначення гейта	Матричне представлення	Схематичне зображення
$Ry(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma^y}$	$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$	
$Rz(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma^z}$	$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$	
$H = Ry(\pi/2)\sigma^x$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$	
$CNOT = I \otimes \sigma^x$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	

Табл. 1. Список операторів квантових вентилів.

зрозуміло, що результуючий стан першого регістра після другого кроку є стан вигляду $|\varphi_1 \dots \varphi_t\rangle$. Вимір таким чином дає точно φ .

Алгоритм квантової оцінки фази.

Вхідні дані:

1. Чорна скринька, яка дозволяє виконати *controlled* – U^j операцію, для цілого j .
2. Власний стан $|U\rangle$ унітарного перетворення з власним значенням $e^{2\pi i\varphi}$.
3. $t = n \lceil \log(2 + \frac{1}{2\epsilon}) \rceil$ кубітів, які знаходяться в стані $|0\rangle$.

Вихідні дані: n -бітове наближення $\tilde{\varphi}_n$ та φ_n .

Процедура:

1. $|0\rangle |U\rangle$ – початковий стан
2. $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle |U\rangle$ – створення суперпозиції.
3. $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle U^j |U\rangle$ – застосування "чорної скриньки".
4. $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} e^{2\pi i j \varphi_n} |j\rangle |U\rangle$ – результат роботи "чорної скриньки".
4. $|\tilde{\varphi}_n\rangle |U\rangle$ – застосування оберненого перетворення Фур'є.
5. $\tilde{\varphi}_n$ – вимір першого регістра.

Процедура оцінки фази може бути використана для розв'язання цілої низки цікавих задач, таких як, наприклад, проблема знаходження періода та проблема факторизації.

У табл. 1 напередодні деякі квантові гейти з їх позначеннями та матричними представленнями.

Розділ 2

Еволюція середнього значення пробного спіна та енергетичні рівні спінових систем

Розглянемо задачу знаходження енергетичних рівнів (власних значень) гамільтоніана H

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.1)$$

Енергетичні рівні обмежені знизу, тому можна зсунути їх в додатну сторону додавши до гамільтоніана константу C .

Додавши до такої системи спін-зонд можна записати загальний гамільтоніан у наступному вигляді [1]

$$H_T = \sigma_0^z (H + C) \quad (2.2)$$

Зауважимо, що $[\sigma_0^z, H] = 0$, а власні значення оператора σ_0^z дорівнюють ± 1 . Спектр власних значень загального гамільтоніана H_T є симетричним, він містить додатні власні значення $H + C$ та симетричні від'ємні $-(H + C)$.

Оператори які антикомутують з загальним гамільтоніаном H_T :

$$\{\sigma_0^x, H_T\} = \{\sigma_0^y, H_T\} = 0 \quad (2.3)$$

Розглянемо середнє значення σ_0^x еволюція якого визначається H_T . Починаючи з початкового стану $|\psi\rangle$ знаходимо [1]

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0^x(t) \rangle &= \langle \psi_0 | e^{iH_T t/\hbar} \sigma_0^x e^{-iH_T t/\hbar} | \psi_0 \rangle = \\ &= \langle \psi_0 | e^{2iH_T t/\hbar} \sigma_0^x | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \sigma_0^x e^{-2iH_T t/\hbar} | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

В (2.4) враховано, що $e^{iH_T t/\hbar} \sigma_0^x = \sigma_0^x e^{-iH_T t/\hbar}$. Розклавши початковий стан за власними станами загального гамільтоніана $|E_T^i\rangle$, які відповідають енергіям E_T^i , отримаємо $|\psi_0\rangle = \sum_i c_i |E_T^i\rangle$. Тоді для $\langle \sigma_0^x(t) \rangle$ запишемо

$$\langle \sigma_0^x(t) \rangle = \sum_j g_j e^{-i2\omega_T^j t}, \quad (2.5)$$

де $g_j = \sum_i c_i^* \langle E_T^i | \sigma_0^x | E_T^i \rangle c_j$ та $\omega_T^i = E_T^i/\hbar$ [1].

Для знаходження енергетичних рівнів системи H використаємо Фур'є перетворення для $\langle \sigma_0^x(t) \rangle$. Тоді отримаємо

$$\sigma_0^x(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \sigma_0^x(t) \rangle e^{i\omega t} = \sum_i g_i \delta(\omega - 2\omega_T^i). \quad (2.6)$$

Зауважимо, що функція $\sigma_0^x(t)$ має δ -піки в $\omega = 2\omega_T^i$, що відповідає енергетичним рівням $E_T^i = \hbar\omega_T^i$ [1].

Для виявлення всіх піків, що відповідають власним значенням H_T у Фур'є перетворенні інтервал часу τ обирається так, щоб задовольнити наступну рівність $\tau = \pi/2\omega_T^{max}$. Де ω_T^{max} відповідають максимальному власному значенню H_T $E_T^{max} = \hbar\omega_T^{max}$.

Для визначення частоти ω_T^i розглянемо перетворення Фур'є (2.6)

$$\sigma_0^x(\omega) = \frac{1}{2^{N+1}} \sum_i g_i \delta(\omega - 2\omega_T^i), \quad (2.7)$$

де $g_i = 1/2^{N+1}$. Таким чином, функція $\sigma(\omega)$ має δ -піки в $\omega = 2\omega_T^i$. Це дозволяє знайти частоти ω_T^i , які відповідають енергетичним рівням $E_i = 2\hbar\omega_T^i$ загального гамільтоніана. Додатна частина цього спектра відповідає енергетичним рівням системи гамільтоніана H (2.2) зміщеного на константу C .

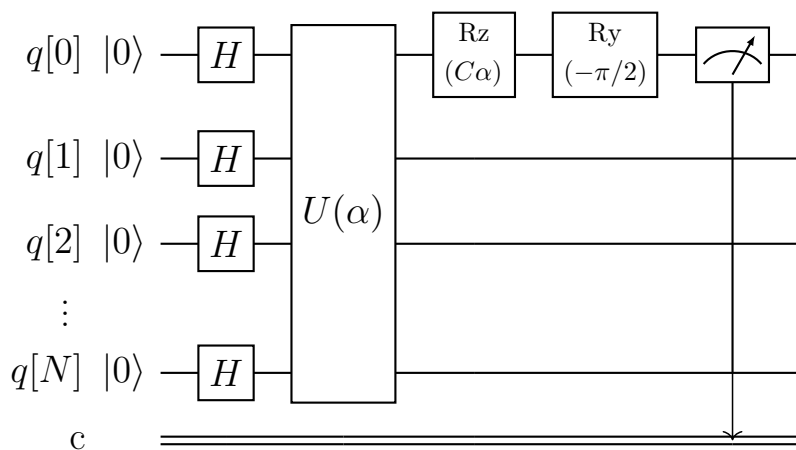


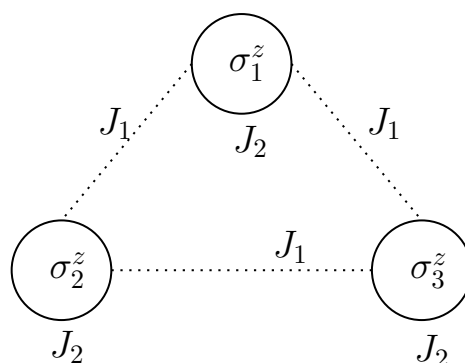
Рис. 1. Квантовий протокол для вивчення еволюції середнього значення пробного спіна на квантовому комп'ютері, $U(\alpha) = \exp(-i\alpha\sigma_0^z H/2)$, $\alpha = 2t/\hbar$ [1].

Квантовий протокол для дослідження еволюції середнього значення пробного спіна представлений на рис. 1. В протоколі $\alpha = 2t/\hbar$,

$U(\alpha) = \exp(-i\sigma_0^y H/2)$. Для кількісної оцінки середнього значення σ_0^x потрібно врахувати, що оператор σ_0^x може бути представлений як $\sigma_0^x = \exp(-i\pi\sigma_0^y/4)\sigma_0^z\exp(i\pi\sigma_0^y/4)$. Перед вимірюванням в стандартному базисі стан відповідного кубіта має бути повернутий гейтом $Rz(-\pi/2)$.

У **Розділі 3** представлений прокол буде використано для вивчення енергетичних рівнів деяких спінових систем на квантовому комп'ютері ІВМ.

2.1 Трикутний спіновий кластер з магнітним полем відмінним від взаємодії



Розглянемо систему 3 спінів зі взаємодією Ізінга та магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію. Гамільтоніан такої системи

$$H = J_1\sigma_1^z\sigma_2^z + J_1\sigma_2^z\sigma_3^z + J_1\sigma_1^z\sigma_3^z + J_2\sigma_1^z + J_2\sigma_2^z + J_2\sigma_3^z \quad (2.8)$$

де J_1 – міра взаємодії між спінами, J_2 – взаємодія спінів з полем, причому $J_1 = 2J_2$.

Загальний гамільтоніан системи з додаковим спіном виглядає наступним чином

$$H_T = \sigma_0^z(H + C) = J\sigma_0^z(\sigma_1^z\sigma_2^z + \sigma_2^z\sigma_3^z + \sigma_1^z\sigma_3^z + \frac{1}{2}\sigma_1^z + \frac{1}{2}\sigma_2^z + \frac{1}{2}\sigma_3^z + 7), \quad (2.9)$$

де константа $C = 7J$ – додана для того, щоб змістити енергетичний спектр гамільтоніана системи в область додатних значень.

Розглянемо еволюцію вектора стану керованого гамільтоніаном H_T . Початковий стан оберемо

$$|\psi_0\rangle = |++++\rangle = H^{[3+1]}|0000\rangle = \frac{1}{4} \sum_{x_0x_1x_2x_3} |x_0x_1x_2x_3\rangle, \quad (2.10)$$

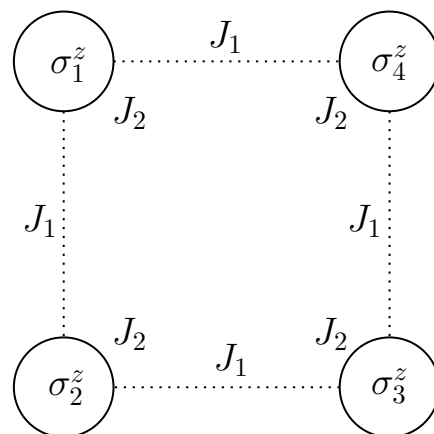
де $H^{[3+1]} = \prod_{i=0}^4 H_i$, H_i – оператор Адамара який діє на i -тий кубіт, $x_i = 0,1$. Кубіт пов'язаний зі спіном наступним чином $|0\rangle = |\uparrow\rangle$, $|1\rangle = |\downarrow\rangle$.

Еволюція середнього значення σ_0^x

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0^x(t) \rangle &= \langle + + + + | \sigma_0^x e^{-i2H_T t/\hbar} | + + + + \rangle = \frac{1}{2^{3+1}} \times \\ &\times \sum_{x_0, x_1, x_2, x_3} \langle x_0 x_1 x_2 x_3 | e^{-i2H_T t/\hbar} | x_0 x_1 x_2 x_3 \rangle = \frac{1}{2^4} \sum_{k=1}^{2^4} e^{-i2\omega_T^k t}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Враховано, що $\sigma_0^x |+\rangle = |+\rangle$, $|x_0 x_1 x_2 x_3\rangle$ – власний стан загального гамільтоніана H_T , а ω_T^i енергетичні рівні в одиницях \hbar .

2.2 Модель Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем відмінним від взаємодії



Розглянемо систему 4 спінів зі взаємодією Ізінга та магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію. Гамільтоніан такої системи

$$H = J_1 \sigma_1^z \sigma_2^z + J_1 \sigma_2^z \sigma_3^z + J_1 \sigma_3^z \sigma_4^z + J_1 \sigma_1^z \sigma_4^z + J_2 \sigma_1^z + J_2 \sigma_2^z + J_2 \sigma_3^z + J \sigma_4^z. \quad (2.12)$$

де J_1 – міра взаємодії між спінами, J_2 – взаємодія спінів з полем, причому $J_1 = 2J_2$.

Загальний гамільтоніан системи з додаковим спіном та доданою константою $C = 9J$ для зсуву спектра в область додатніх значень, виглядає наступним чином

$$\begin{aligned} H_T = \sigma_0^z (H + C) &= J \sigma_0^z \sigma_1^z \sigma_2^z + J \sigma_0^z \sigma_2^z \sigma_3^z + J \sigma_0^z \sigma_3^z \sigma_4^z + J \sigma_0^z \sigma_1^z \sigma_4^z + \frac{1}{2} J \sigma_0^z \sigma_1^z + \\ &+ \frac{1}{2} J \sigma_0^z \sigma_2^z + \frac{1}{2} J \sigma_0^z \sigma_3^z + \frac{1}{2} J \sigma_0^z \sigma_4^z + 9J \sigma_0^z, \end{aligned} \quad (2.13)$$

Початковий стан оберемо

$$|\psi_0\rangle = |+++++\rangle = H^{[4+1]} |00000\rangle = \frac{1}{2^{5/2}} \sum_{x_0 x_1 x_2 x_3 x_4} |x_0 x_1 x_2 x_3 x_4\rangle, \quad (2.14)$$

де $H^{[4+1]} = \prod_{i=0}^5 H_i$, H_i – оператор Адамара який діє на i -тий кубіт, $x_i = 0,1$.

Еволюція середнього значення σ_0^x

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0^x(t) \rangle &= \langle +++++ | \sigma_0^x e^{-i2H_T t/\hbar} | +++++ \rangle = \frac{1}{2^{4+1}} \times \\ &\times \sum_{x_0, x_1, x_2, x_3, x_4} \langle x_0 x_1 x_2 x_3 x_4 | e^{-i2H_T t/\hbar} | x_0 x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle = \frac{1}{2^5} \sum_{k=1}^{2^5} e^{-i2\omega_T^k t}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Де $|x_0 x_1 x_2 x_3\rangle$ – власний стан загального гамільтоніана H_T , а ω_T^i енергетичні рівні в одиницях \hbar .

Розділ 3

Оцінка енергетичних рівнів спінових систем на квантовому комп'ютері ІВМ

3.1 Вивчення еволюції пробного спіна в моделі трикутного спінового кластера

Розглянемо трикутний спіновий кластер який описується наступним гамільтоніаном

$$H = J_1\sigma_1^z\sigma_2^z + J_1\sigma_2^z\sigma_3^z + J_1\sigma_1^z\sigma_3^z + J_2\sigma_1^z + J_2\sigma_2^z + J_2\sigma_3^z \quad (3.1)$$

Обравши константу $C = 7J_1$, а магнітне поле в два рази меншим за взаємодію $J_1 = 2J_2$, загальний гамільтоніан можна записати як

$$H = J\sigma_0^z(\sigma_1^z\sigma_2^z + \sigma_2^z\sigma_3^z + \sigma_1^z\sigma_3^z + \frac{1}{2}\sigma_1^z + \frac{1}{2}\sigma_2^z + \frac{1}{2}\sigma_3^z + 7) \quad (3.2)$$

Квантовий протокол для вивчення середнього значення σ_0^x у випадку трикутного спінового кластера наведена на рис. 2.

Результати обчислень на квантовому симуляторі середнього значення σ_0^x для кута $\alpha/2 = Jt/\hbar$, який змінюється від -8π до 8π з кроком $\pi/30$ представлені на рис. 4.

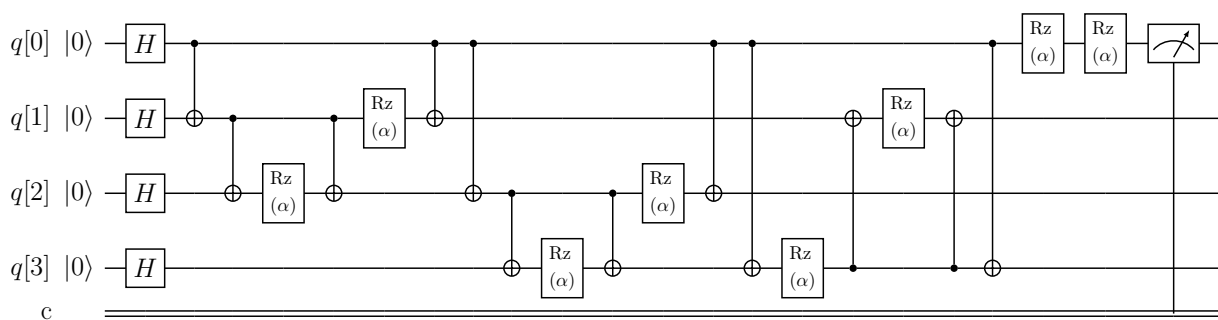


Рис. 2. Квантовий протокол для дослідження еволюції середнього значення σ_0^x у випадку моделі трикутного спінового кластера в магнітному полі на квантовому комп'ютері. Тут $C = 7J$, $\alpha = 2Jt/\hbar$.

3.2 Вивчення еволюції пробного спіна в моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітному полі

В цьому параграфі розглядається модель Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію. Ми вивчаємо наступний гамільтоніан

$$H = J_1\sigma_1^z\sigma_2^z + J_1\sigma_2^z\sigma_3^z + J_1\sigma_3^z\sigma_4^z + J_1\sigma_1^z\sigma_4^z + J_2\sigma_1^z + J_2\sigma_2^z + J_2\sigma_3^z + J_2\sigma_4^z. \quad (3.3)$$

Тоді загальний гамільтоніан буде мати наступний вигляд

$$H = J\sigma_0^z(\sigma_1^z\sigma_2^z + \sigma_2^z\sigma_3^z + \sigma_3^z\sigma_4^z + \sigma_1^z\sigma_4^z + \frac{1}{2}\sigma_1^z + \frac{1}{2}\sigma_2^z + \frac{1}{2}\sigma_3^z + \frac{1}{2}\sigma_4^z + 9). \quad (3.4)$$

Константу тут вибираємо такою: $C = 9J$. У цьому випадку енергетичні рівні H є додатними. На рис. 3 представлено квантовий протокол для дослідження еволюції $\langle\sigma_0^x\rangle$ на квантовому комп'ютері у випадку повного гамільтоніана (3.4).

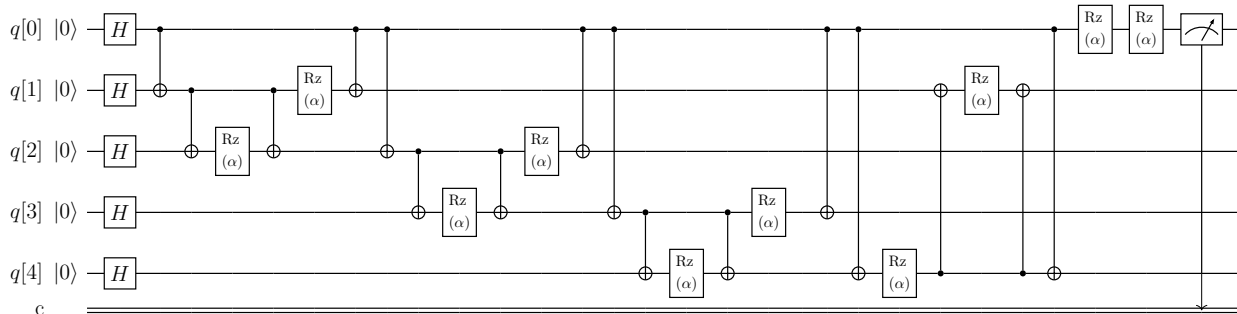


Рис. 3. Квантовий протокол для дослідження еволюції середнього значення σ_0^x у випадку моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітному полі на квантовому комп'ютері. Тут $C = 9J$, $\alpha = 2Jt/\hbar$.

Результати обчислень на квантовому симуляторі середнього значення σ_0^x для кута $\alpha/2 = Jt/\hbar$, який змінюється від -8π до 8π з кроком $\pi/30$ представлені на рис. 5.

3.3 Результати квантових вимірювань

Досліджено еволюцію середнього значення σ_0^x для зміни $\alpha/2 = Jt/\hbar$ від -8π до 8π з кроком $\pi/30$ з використанням квантового протоколу (рис. 2) для

моделі трикутного спінового кластера з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію. Розрахунки виконувалися на квантовому симуляторі ІВМ. Отримані результати представлені на рис. 4. На цьому графіку бачимо $Re\sigma_0^x(\omega)$, отримані на основі обчислень на `ibmq-qasm-simulator`. Різкі піки $Re\sigma_0^x(\omega)$ в точках $\omega = \pm 11$, $\omega = \pm 13$, $\omega = \pm 17$, $\omega = \pm 23$, які відповідають енергіям загального гамільтоніана (3.2) $E_T = \pm 5,5J$, $E_T = \pm 6,5J$, $E_T = \pm 8,5J$, $E_T = \pm 11,5J$ відповідно. Отже, на основі квантових розрахунків, отримуємо енергетичні рівні трикутного спінового кластера (3.1) $E = -1,5J$, $E = -0,5J$, $E = 1,5J$, $E = 4,5J$. Отримані результати добре узгоджуються з теоретичним.

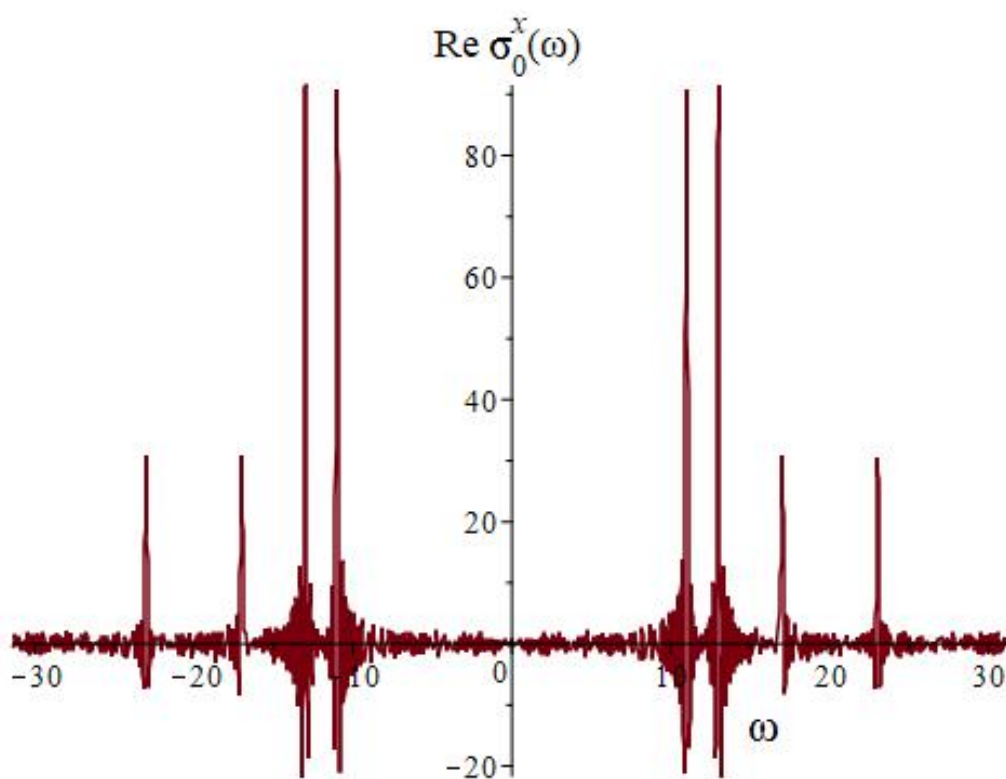


Рис. 4. Результати кількісної оцінки енергетичних рівнів трикутного спінового кластера (3.1). Дійсна частина $\sigma_0^x(\omega)$, отримана на основі розрахунків $\sigma_0^x(t)$ на `ibmq-qasm-simulator`. Піки $Re\sigma_0^x(\omega)$ при $\omega = \pm 11$, $\omega = \pm 13$, $\omega = \pm 17$, $\omega = \pm 23$ відповідають енергіям $E_T = \pm 5,5J$, $E_T = \pm 6,5J$, $E_T = \pm 8,5J$, $E_T = \pm 11,5J$ загального гамільтоніана (3.2) і енергіям $E = -1,5J$, $E = -0,5J$, $E = 1,5J$, $E = 4,5J$ трикутного спінового кластера (3.1).

Також на квантовому симуляторі було досліджено еволюцію середнього

значення σ_0^x для зміни $\alpha/2 = Jt/\hbar$ від -8π до 8π з кроком $\pi/30$ з використанням квантового протоколу (рис. 3) для моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітному полі з полем вдвічі меншим за взаємодію. Отримані результати представлені на рис. 4. На цьому графіку бачимо $Re\sigma_0^x(\omega)$, отримані на основі обчислень на `ibmq-qasm-simulator`. Різкі піки $Re\sigma_0^x(\omega)$ в точках $\omega = \pm 11, \omega = \pm 13, \omega = \pm 17, \omega = \pm 23$, які відповідають енергіям загального гамільтоніана (3.2) $E_T = \pm 5,5J, E_T = \pm 6,5J, E_T = \pm 8,5J, E_T = \pm 11,5J$ відповідно. Отже, на основі квантових розрахунків, отримуємо енергетичні рівні трикутного спінового кластера (3.1) $E = -1,5J, E = -0,5J, E = 1,5J, E = 4,5J$. Отримані результати добре узгоджуються з теоретичним.

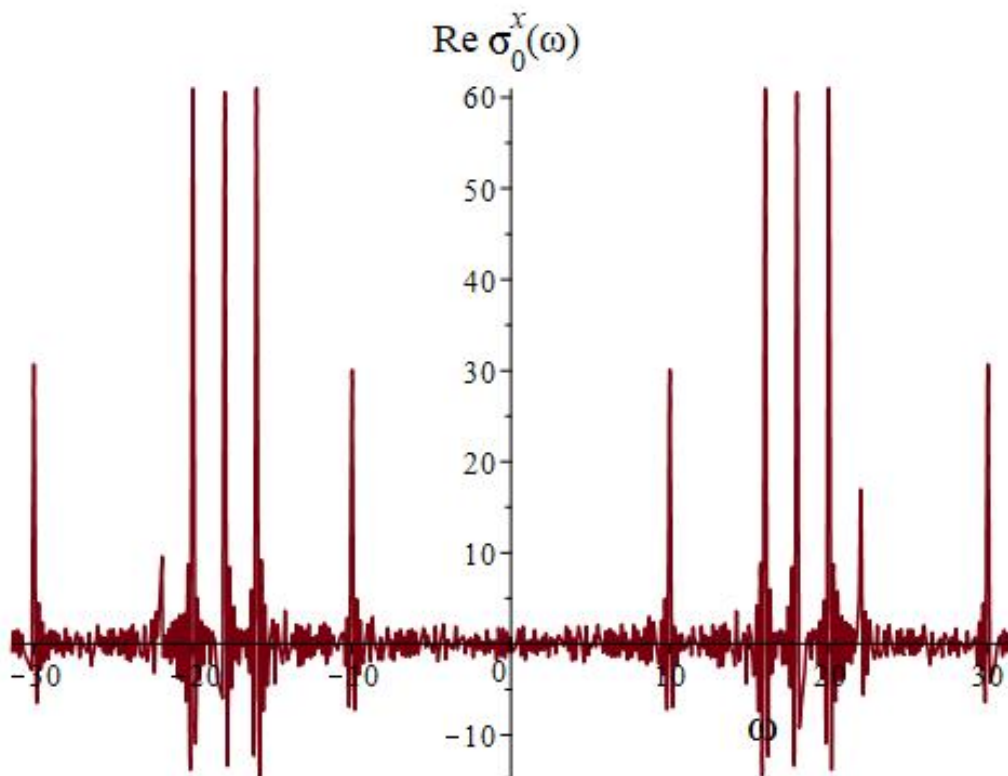


Рис. 5. Результати кількісної оцінки енергетичних рівнів моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітному полі (3.3). Дійсна частина $\sigma_0^x(\omega)$, отримана на основі результатів розрахунків $\sigma_0^x(t)$ на `ibmq-qasm-simulator`. Піки $Re\sigma_0^x(\omega)$ при $\omega = \pm 10, \omega = \pm 16, \omega = \pm 20, \omega = \pm 22, \omega = \pm 30$ відповідають енергіям $E_T = \pm 5J, E_T = \pm 8J, E_T = \pm 10J, E_T = \pm 11J, E_T = \pm 15J$ загального гамільтоніана (3.4) і енергій $E = -4J, E = -J, E = J, E = 2J, E = 6J$ моделі Ізінга на квадратній ґратці в магнітнітному полі (3.3).

Висновки

У рамках досліджень було розглянуто деякі моделі спінових систем з магнітною взаємодією. Для виконання кількісної оцінки енергетичних рівнів таких систем було застосовано метод запропонований авторами [1].

Цей метод дозволяє виконувати кількісну оцінку енергетичних рівнів спінової системи на основі досліджень еволюції пробного спіну. Метод дає можливість оцінити енергетичні рівні багатоспінової системи, вивчаючи еволюцію середнього значення пробного спіна, і може бути застосований для довільних спінових систем.

Під час виконання роботи було реалізовано запропонований в [1] алгоритм на квантовому симуляторі IBM `ibmq-qasm-simulator` (квантові схеми див. рис. 2, 3) і виконано кількісну оцінку енергетичні рівні спінових систем із взаємодією Ізінга (трикутний спіновий кластер, модель Ізінга на квадратній ґратці з магнітним полем вдвічі меншим за взаємодію). Результати розрахунків на квантовому симуляторі (див. рис. 4, 5) повністю узгоджуються з теоретичними результатами.

Список використаних джерел

1. Gnatenko, K.P., Laba, H.P. Tkachuk, V.M. Detection of energy levels of a spin system on a quantum computer by probe spin evolution. *Eur. Phys. J. Plus* 137, 522 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-02753-0>
2. A. Kitaev, Quantum measurements and the Abelian Stabilizer Problem, arXiv:quant-ph/9511026 (1995).
3. D. S. Abrams, S. Lloyd, Simulation of many-body fermi systems on a universal quantum computer, *Phys. Rev. Lett.* 79 2586 (1997).
4. D. S. Abrams, S. Lloyd, Quantum algorithm providing exponential speed increase for finding eigenvalues and eigenvectors, *Phys. Rev. Lett.* 83 5162 (1999).
5. A. Y. Kitaev, Quantum computations: algorithms and error correction, *Russian Math. Surveys* 52 1191 (1997).
6. M. Dobšiček, G. Johansson, V. Shumeiko, G. Wendin, Arbitrary accuracy iterative quantum phase estimation algorithm using a single ancillary qubit: A two-qubit benchmark, *Phys. Rev. A* 76, 030306 (2007).
7. S. Paesani, A. A. Gentile, R. Santagati et al, Experimental bayesian quantum phase estimation on a silicon photonic chip, *Phys. Rev. Lett.* 118, 100503 (2017).
8. J. B. Parker, I. Joseph, Quantum phase estimation for a class of generalized eigenvalue problems *Phys. Rev A* 102, 022422 (2020).
9. P. M. Q. Cruz, G. Catarina, R. Gautier, J. Fernández-Rossier, Optimizing quantum phase estimation for the simulation of Hamiltonian eigenstates, *Quantum Sci. Technol.* 5 044005 (2020).
10. A. E. Russo, K. M. Rudinger, B. C. A. Morrison, A. D. Baczewski, Evaluating energy differences on a quantum computer with robust phase estimation, *Phys. Rev. Lett.* 126, 210501 (2021).
11. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, A Quantum Approximate Optimization Algorithm arXiv:1411.4028 (2014).

12. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, A Quantum Approximate Optimization Algorithm Applied to a Bounded Occurrence Constraint Problem, arXiv:1412.6062 (2014).
13. N. Moll, P. Barkoutsos, L. S. Bishop et al. Quantum optimization using variational algorithms on near-term quantum devices. *Quantum Sci. Technol.* 3, 030503 (2018).
14. F. G. Fuchs, H. O. Kolden, N. H. Aase, G. Sartor Efficient Encoding of the Weighted MAX k-CUT on a Quantum Computer Using QAOA *SN Computer Science* 2, 89 (2021).
15. R. D. Somma, Quantum eigenvalue estimation via time series analysis, *New J. Phys.* 21 123025 (2019).
16. R. Somma, G. Ortiz, J. E. Gubernatis, E. Knill, R. Laflamme, Simulating physical phenomena by quantum networks, *Phys. Rev. A*, 65, 042323 (2002).
17. M. Motta, Ch. Sun, A. T. K. Tan et al, Determining eigenstates and thermal states on a quantum computer using quantum imaginary time evolution, *Nature Physics* 16, 205 (2020).
18. Jin-Guo Liu, Yi-Hong Zhang, Yuan Wan, Lei Wang, Variational quantum eigensolver with fewer qubits, *Phys. Rev. Research* 1, 023025 (2019).
19. Kh. P. Gnatenko, H. P. Laba, V. M. Tkachuk, Energy levels estimation on a quantum computer by evolution of a physical quantity, *Phys. Lett. A* 424, 127843 (2022).
20. <https://www.ibm.com/quantum-computing>